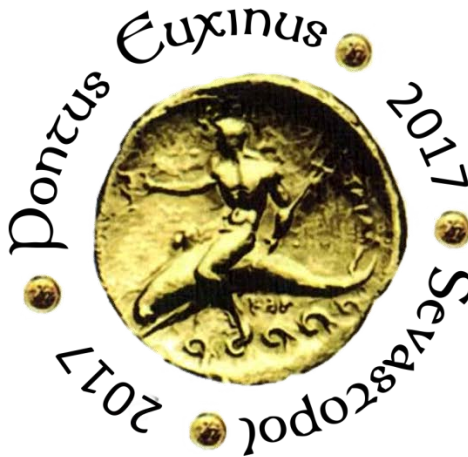


Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки «Институт морских биологических исследований
имени А.О. Ковалевского РАН»

PONTUS EUXINUS
ПОНТ ЭВКСИНСКИЙ : X



Тезисы X Всероссийской
научно-практической конференции
молодых ученых

«*Pontus Euxinus* 2017»

по проблемам водных экосистем,
в рамках проведения Года экологии
в Российской Федерации

Севастополь
2017

Кондратьев М.С.¹, Терентьев В.В.², Шитов А.В.²

¹ФГБУН «Институт биофизики клетки РАН», Институтская, 3, г. Пущино, Московской области, 142290

²ФГБУН Институт фундаментальных проблем биологии РАН, ул. Институтская, 2, г. Пущино, Московская обл., 142290
ma-ko@bk.ru

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ИНГИБИТОРОВ ВОДОРΟΣЛЕВОГО РОСТА И ИХ МИШЕНЕЙ: QM-ИССЛЕДОВАНИЕ

Существенной проблемой многих открытых водоемов, а также искусственных систем хранения технической воды является массовое размножение и резкое увеличение общей биомассы водорослей – т.н. «цветение». У фотосинтезирующих микроорганизмов имеется множество ключевых физиологических систем и биохимических циклов, функционирование которых можно селективно ингибировать. Одной из таких важнейших, но уязвимых систем, являются ферменты карбоангидразы, принимающие участие в образовании углеводов при фотосинтезе – например, белок *Cah3*, который был выбран нами в качестве модельной системы для поиска эффективных ингибиторов карбоангидраз. Разрабатываемые химические агенты будут действовать только на водоросли, не повреждая другие организмы вокруг.

В данной работе при помощи современных методов вычислительной химии теоретически изучены особенности некоторых структурных и термодинамических параметров молекул ингибиторов карбоангидразы *Cah3* из *Chlamydomonas reinhardtii*.

Выполненные нами квантово-химические расчеты позволили исследовать конформационную лабильность ряда веществ-кандидатов, молекул на основе сурьмы. Эти симметричные соединения с двумя бензольными кольцами, а также с галогеновыми заместителями, являются столь же эффективными ингибиторами изучаемого фермента, как и классические соединения: ацетазоламид, этоксизоламид, ТФМСА. Для галогеновых производных нами показано уменьшение термодинамической стабильности таких молекул в ряду F–Cl–Br–I, а также отмечена важная стабилизирующая роль водородных связей между N–H и бензольными кольцами.

При помощи методов гибкого докинга нами изучен механизм взаимодействия ряда ингибиторов с аминокислотными остатками, формирующими активный центр карбоангидразы *Cah3*.